



## Defektstrukturer i keramiske superledere

Andersen, Niels Hessel

*Publication date:*  
1993

*Document Version*  
Publisher's PDF, also known as Version of record

[Link back to DTU Orbit](#)

*Citation (APA):*  
Andersen, N. H. (1993). *Defektstrukturer i keramiske superledere*. Risø National Laboratory. Denmark. Forskningscenter Risoe. Risoe-R No. 710(DA)

---

### General rights

Copyright and moral rights for the publications made accessible in the public portal are retained by the authors and/or other copyright owners and it is a condition of accessing publications that users recognise and abide by the legal requirements associated with these rights.

- Users may download and print one copy of any publication from the public portal for the purpose of private study or research.
- You may not further distribute the material or use it for any profit-making activity or commercial gain
- You may freely distribute the URL identifying the publication in the public portal

If you believe that this document breaches copyright please contact us providing details, and we will remove access to the work immediately and investigate your claim.

# Defektstrukturer i keramiske superledere

Niels Hessel Andersen

*Defektstrukturer i  
keramiske superledere*

# **Defektstrukturer i keramiske superledere**

**Risø-R-710(DA)**

**Niels Hessel Andersen**

**Forskningscenter Risø, Roskilde  
December 1993**

**Resumé** Studier af defektstrukturens indflydelse på de superledende egenskaber af keramiske højtemperatur superledere er gennemført ved eksperimentelle undersøgelser og med computer simuleringsteknik. Sammenhængen mellem defektstruktur og superledende overgangstemperatur,  $T_c$ , er studeret i Co-dopet YBCO ( $\text{YBa}_2\text{Cu}_{3-y}\text{Co}_y\text{O}_{6+x}$ ,  $0 \leq y \leq 0.5$ ), og det er påvist, at sammenhængen mellem den strukturelle iltorden og  $T_c$ , som er etableret for iltfattig YBCO ( $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6-x}$ ,  $x < 1$ ), også er gældende for Co-dopet YBCO. En tre-dimensionel strukturel model for iltordenen i udopet YBCO er blevet introduceret og anvendt til at analysere eksperimentelle strukturelle data, og der er tilvejebragt god overensstemmelse mellem modelberegningerne og de målte strukturelle data. Eksperimentelle undersøgelser af iltindhold, krystalstruktur, og elektriske og superledende egenskaber er gennemført på  $\text{Nd}_{1-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_{4-x}$  for at studere baggrunden for, at dette materiale tilsyneladende har elektronisk ledningsevne i den superledende fase, og ikke, som i de øvrige højtemperatur superledere, hul-ledningsevne. På  $\text{Pb}_2\text{Sr}_2\text{Y}_{1-x}\text{Ca}_x\text{Cu}_3\text{O}_8$  ( $0 \leq x \leq 0.5$ ) er udført strukturelle studier med neutrodiffraction som viser, hvorledes Ca-støkiometrien påvirker Cu-valensen i de superledende  $\text{CuO}_2$ -planer. Den strukturelle orden af epitaksielle tyndfilm af YBCO og  $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_3\text{O}_{8-x}$  deponeret på opvarmede  $\text{SrTiO}_3$ ,  $\text{MgO}$ ,  $\text{LaAlO}_3$  og  $\text{NdGaO}_3$  substrater er blevet studeret med røntgendiffraktion og Rutherford Backscattering spektroskopi, og den strukturelle orden som funktion af substrat og substrattemperatur er blevet analyseret i sammenhæng med de superledende egenskaber.

Slutrapport for EFP91-projektet: Defektstrukturer i keramiske superledere *EM-Journal* nr. 1443/91-(XX)5, område 8: Brændselsceller m.v.

ISBN 87-550-1931-5  
ISSN 0106-2840

Grafisk Service, Risø, 1993

# Indhold

## Forord 4

### 1 Indledning 5

### 2 Strukturel iltorden og superledning i Co-dopet $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6-x}$ 5

### 3 Tre-dimensionelle simuleringstudier af strukturel iltorden i $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6.4}$ 8

### 4 Krystalstruktur, magnetisk susceptibilitet og termokraft af superledende og ikke-superledende $\text{Nd}_{1-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_{4-x}$ 9

### 5 Krystalstruktur og ladningslokalisering i $\text{Pb}_x\text{Sr}_2\text{Y}_{1-x}\text{Ca}_x\text{Cu}_3\text{O}_8$ 10

### 6 Deponeringstemperaturens indvirkning på mikrostruktur og kritisk strømtæthed af epitaksielle $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6-x}$ tyndfilm på $\text{SrTiO}_3$ (001) 12

### 7 Strukturelle undersøgelser af epitaksielle $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_{8-x}$ tyndfilm på $\text{MgO}$ (001), $\text{LaAlO}_3$ (001), og $\text{NdGaO}_3$ (001) 14

### 8 Samarbejde og kommunikation af resultater 15

## Referencer 19

# Forord

Nærværende rapport er en slutrapport for det arbejde, som er udført under EFP91-projektet: "Defektstrukturer i keramiske superledere" (EM-Journal nr. 1443/91-0005, område 8: Brændselsceller m.v.). Til det to-årige projekt er modtaget støtte på ialt 400.000,- kr. Det beskrevne arbejde er udført i forlængelse af EFP88-projektet: "Udvikling af keramiske superledere" (EM-Journal nr. 1443/88-8, område 8: Energilagring. Se den tidligere fremsendte slutrapport), og i 1991 parallelt med EFP90-projektet: "Strukturelle undersøgelser af keramiske superledere" (EM-Journal nr. 1443/90-0006, område 8: Brændselsceller m.v. Se slutrapporten: Andersen, N.H. (1992)). Dele af arbejdet, som således er rapporteret under EFP90-projektet: "Strukturelle undersøgelser af keramiske superledere", vil ikke blive omtalt i nærværende rapport. Det skal endvidere anføres, at arbejdet fortsættes i EFP93-projektet: "Doping effekter i højtemperatur superledere", og at de studier, som er påbegyndt under det nærværende projekt, men hvor afsluttede delprojekter endnu ikke foreligger, vil blive rapporteret under EFP93-projektet.

Følgende projektdeltagere i Afdelingen for Faststoffysik har bidraget til det udførte arbejde:

Niels Hessel Andersen, seniorforsker, lic. scient., projektleder

Thomas Fiig, Ph.d. studerende

Rasmus Kromann, Ph.d. studerende

Bente Lebech, seniorforsker, civ. ing.

Per-Anker Lindgård, seniorforsker, Dr.scient.

Mourits Nielsen, seniorforsker, civ.ing.

Roger de Reus, post doc.

Arbejdet er gennemført i samarbejde med en række forskere på danske og udenlandske forskningslaboratorier. Disse samarbejdspartnere er omtalt i afsnit 8.

# 1 Indledning

I de seneste år har den danske og internationale forskning inden for højtemperatur superledere været koncentreret om at forstå baggrunden for højtemperatur superledningen og at udvikle dem til teknologisk anvendelige materialer. Der fokuseres i denne sammenhæng specielt på at forbedre de kritiske materialeparametre for superledningen: den kritiske temperatur,  $T_c$ , den kritiske strøm-tæthed,  $J_c$ , og det kritiske magnetfelt,  $H_c$ . I de eksisterende højtemperatur superledere er de maksimalt opnåelige værdier for  $J_c$  og  $H_c$  tilstrækkeligt høje til alle praktiske formål, men der kræves en betydelig teknologisk udvikling for, at de kan nås. Dette hænger sammen med materialernes keramiske karakter, og at korngrænserne ikke nødvendigvis har de ønskede superledende egenskaber. Ligeledes er det nødvendigt at fastholde det magnetiske fluks-gitter, som dannes i højtemperatur superledere, når de pålægges et ydre magnetfelt over en vis størrelse. Der foregår fortsat en hektisk international aktivitet med henblik på at fremstille højtemperatur superledere med endnu højere kritiske værdier end de nu kendte ( $T_{c,max} = 150$  Kelvin), men denne udvikling går langsomt. Da den grundlæggende forståelse for højtemperatur superledningen fortsat endnu ikke er fastlagt, er det uvist om den næste betydningsfulde milepæl i udviklingen: en superleder ved stuetemperatur, kan opnås. Det er imidlertid fastslået, at en række teknologiske anvendelser af de eksisterende højtemperatur superledere, som kan køles til den superledende fase med flydende kvælstof, er økonomisk attraktive, hvis de materialeteknologiske problemer med at optimere  $J_c$  og  $H_c$  kan overvindes. Det her beskrevne arbejde skal ses i sammenhæng med ønsket om at bidrage til forståelsen af højtemperatur superledernes grundlæggende egenskaber og til at forbedre deres materialeegenskaber. Det skal i denne sammenhæng nævnes, at arbejdet foregår parallelt og i delvist samarbejde med de danske virksomheder, Haldor Topsøe A/S og NKT Research Center A/S, som har opnået resultater, der bringer disse firmaer med i den absolutte frontlinje af den materialeteknologiske udvikling på området.

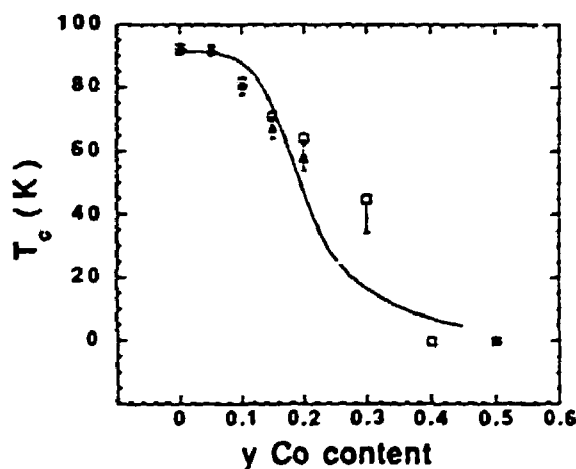
## 2 Strukturel iltorden og superledning i Co-dopet $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6+x}$

Når iltindholdet reduceres i den basale  $\text{CuO}_x$ -plan af højtemperatur superlederen  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6+x}$  ( $0 < x < 1$ ), eller der foretages substitutioner for Cu i denne plan forringes de superledende egenskaber. I det tidligere gennemførte arbejde, omtalt i referencen: Andersen, N.H. (1992), er det vist, at den måde iltreduktion påvirker både den dynamiske og statiske variation af  $T_c$  er korreleret med lignende variationer af de ordnede iltområder i superlederen. Inden for nærværende projekt er der gennemført undersøgelser af, hvorledes doping med metalioner som  $M = \text{Co}$ , Fe og Al, der alle substituerer for Cu i den basale  $\text{CuO}_x$ -plan ( $\text{Cu}_{1-y}\text{M}_y\text{O}_x$ -planen,  $0 < y < 1$ ) påvirker de strukturelle og superledende egenskaber. Da Co, Fe og Al har tilbøjelighed til højere iltningstrin end Cu vil de søge at forøge deres ilt-koordinationstal og dermed forårsage iltuorden i den basale  $\text{Cu}_{1-y}\text{M}_y\text{O}_x$ -plan.

I Co-substitueret YBCO ( $\text{YBa}_2\text{Cu}_{1-y}\text{Co}_y\text{O}_{6+x}$ ) er det ved hjælp af eksperimentelle undersøgelser og med Monte Carlo simuleringer blevet studeret, hvorledes Co-doping fremkalder uorden i iltstrukturen og formindsker  $T_c$ . Prøver med Co-doping niveauer: ( $0 \leq y \leq 0.5$ ) er blevet fremstillet og deres superledende egen-

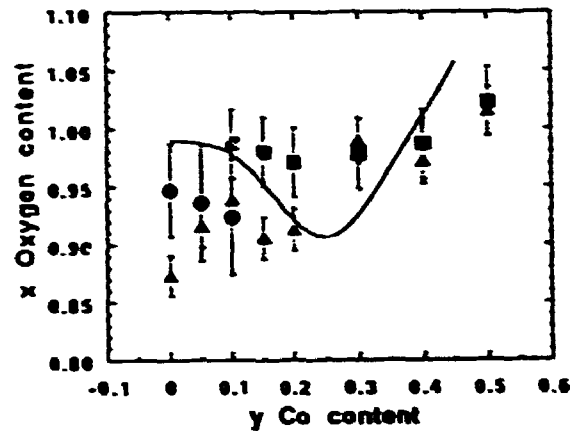
skaber er blevet karakteriseret ved målinger af deres elektriske modstand og magnetiske susceptibilitet. De resulterende overgangstemperaturer (de kritiske temperaturer for superledning) er vist i Fig. 1. De strukturelle egenskaber er blevet studeret med neutroddiffraktion og EXAFS (Extended X-ray Absorption Fine-structure Spectroscopy). Ved analyse af neutroddiffraktions data er det blevet fastlagt, at  $\text{YBa}_2\text{Cu}_{1-y}\text{Co}_y\text{O}_{6+x}$  er orthorhombisk for ( $y < 0.1$ ) og tetragonal for ( $y > 0.1$ ). En lignende overgang fra orthorhombisk til tetragonal struktur finder også sted i udopet  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6+x}$ , når iltindholdet reduceres til ( $x < 0.4$ ), og det er generelt accepteret, at overgangen skyldes uorden i den basale  $\text{CuO}_2$ -struktur. Ved nærmere analyse af neutroddiffraktions dataene er atomernes middelpositioner og udsvingsamplituder blevet fastlagt, og det er godtgjort at Co substituerer for Cu i basalplanen. Der er strukturel orden på de fleste atomare positioner i strukturen, men mindre reduktioner i besætningsallene er fundet på den såkaldte apikale iltplads, som forbinder  $\text{Cu}_1\text{Co}_1\text{O}_4$ -planen med de superledende  $\text{CuO}_2$ -planer (jvnfr. Andersen, N.H. (1992)), og på Co/Cu-pladserne. Mere udtalte afvigelser findes på iltpositionerne i  $\text{Cu}_1\text{Co}_1\text{O}_4$ -planen, som vist i Fig. 2. De foreløbige analyser af EXAFS-datene viser endvidere, at Co-atomerne i  $\text{Cu}_1\text{Co}_1\text{O}_4$ -planen har et ilt-koordinationstal på ca. fem, som er næsten uafhængig af  $y$ .

Iltordenen i den basale  $\text{Cu}_1\text{Co}_1\text{O}_4$ -plan af strukturen er blevet studeret med modelberegninger baseret på en modificeret udgave af den såkaldte ASYNNNI model ved hjælp af Monte Carlo simuleringsteknik. Modellens tre vekselvirkningsparametre,  $V_1$  (frastødende),  $V_2$  (tiltrækkende), og  $V_3$  (frastødende) er vist i Fig. 3. Det kemiske potential i beregningerne er fastlagt til værdien svarende til 1 atmosfære ilt, bestemt ud fra eksperimentelle data fra udopet YBCO. Den forøgede sandsynlighed for ekstra ilt omkring Co-atomerne er inkluderet i modellen på den simplest mulige måde ved at gøre den nærmeste-nabo vekselvirkningsparameter,  $V_1^{\text{Co}}$ , rundt om tilfældigt fordelte Co-atomer mindre frastødende. Sammenligninger med neutroddiffraktions dataene i Fig. 2 og EXAFS data viser, at  $V_1^{\text{Co}} = 0.0$  er et rimeligt valg for vekselvirkningsparameteren omkring Co-atomerne, og at den modificerede ASYNNNI model er et godt startgrundlag for beskrivelsen af iltordningen i Co-dopet YBCO.

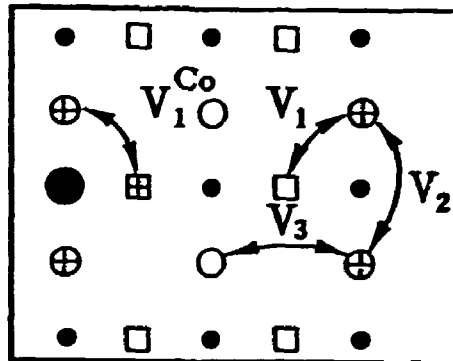


Figur 1: Den superledende overgangstemperatur (den kritiske temperatur for superledning),  $T_c(y)$ , i  $\text{YBa}_2\text{Cu}_{1-y}\text{Co}_y\text{O}_{6+x}$ ,  $\square$  er magnetisk susceptibilitets data, og  $*$  er elektrisk modstands data. Den fuldt optrukne linie er resultatet af »minimal model« beregningen beskrevet i teksten.





Figur 2: Iltindholdet,  $x$ , i fuldt opilet  $\text{YBa}_2\text{Cu}_{1-y}\text{Co}_y\text{O}_{6+x}$ , bestemt ved analyse af neutrodiffractions data i tetragonal (■) og (●) orthorhombisk fase. ▲ er iltindholdet bestemt ved iodimetrisk titreringsanalyse. Den fuldt optrukne linie er resultatet af modelberegninger (se tekst).



Figur 3: Vekselvirkningsparametrene for ilt,  $V_1$ ,  $V_1'$ ,  $V_2$  og  $V_3$  i den modificerede ASYNNNI model for Co-dopet YBCO. • er Cu atomer og ● er et Co atom. ⊕ er besatte iltpositioner i begge de to orthorhombiske ortho-I og ortho-II faser af udopet YBCO, men ○ er kun besat i ortho-I faser. Iltpositionene □ er ikke besat i grundtilstanden af udopet YBCO, men Co doping'en forøger sandsynligheden for at ⊕ er besat.

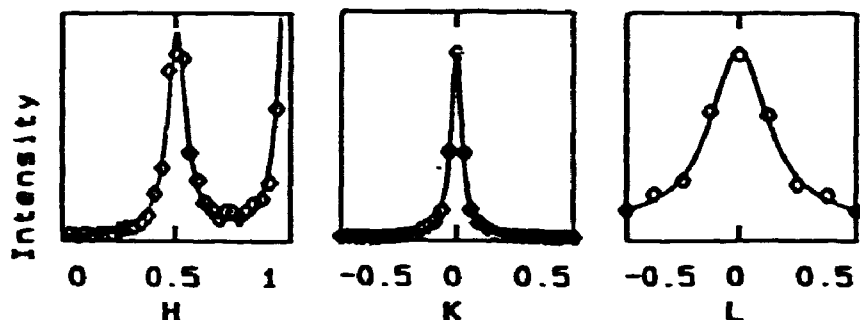
De eksperimentelle data for den superledende overgangstemperatur,  $T_c(y)$ , er blevet analyseret ved hjælp af den såkaldte "minimal model", som blev præsenteret og anvendt til at beskrive den superledende overgangstemperatur i udopet YBCO i EFP90-rapporten: Andersen, N.H. (1992). I den oprindelige "minimal model" er den superledende overgangstemperatur,  $T_c(x)$ , bestemt ud fra en vægtet middelværdi af de områder i strukturen, som har de termodynamisk stabile ordnede iltstrukturer ortho-I og ortho-II (se Fig. 3). Statistikken af iltordningen er bestemt fra modelberegninger med ASYNNNI modellen ved hjælp af Monte Carlo

simuleringssteknik. Den oprindelige "minimal model" er blevet anvendt uden justerbare parametre til beregning af  $T_c(y)$  for Co-dopet YBCO. Som vist i Fig. 2 giver "minimal model" beregningerne en forbløffende god overensstemmelse med de eksperimentelle data, selv om der kun er anvendt én justerbar parameter,  $V_1^{Co}$ , som i princippet er blevet bestemt ud fra de strukturelle data. Resultatet viser, at den strukturelle uorden i YBCO som følge af manglende iltstøkiometri og Co-doping påvirker den superledende overgangstemperatur på en entydig måde. Det omtalte arbejde er publiceret i: Andersen, N.H. et al. (1993).

### 3 Tre-dimensionelle simuleringsstudier af strukturel iltorden i $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6.4}$

I det gennemførte arbejde er betydningen af den strukturelle iltorden for de superledende egenskaber i  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6.4}$ , blevet stadig mere åbenlys. Det er derfor vigtigt at forstå de nøjagtige detaljer i denne ordningsproces. Nylige neutroddiffraktions målinger på én-krystallinsk  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6.4}$  har vist tilstedeværelsen af diffuse superstruktur refleksioner svarende til den orthorhombiske ortho-II fase, der har en krystallografisk enhedscelle, som er fordoblet i a-aksens retning i forhold til den ordnede ortho-I struktur (se Fig. 3 og EFP90-rapporten: Andersen, N.H. (1992)). Udstrækningen af de ordnede områder, der beskrives ved den såkaldte korrelationslængde, er henholdsvis  $10a$ ,  $24b$  og  $2c$ , hvor  $a$ ,  $b$  og  $c$  er længden af siderne i den krystallografiske enhedscelle. Observationen af kontrækkende ortho-II orden er i modstrid med tilstedeværelsen af langtrækkende krystallografisk orden med orthorhombisk symmetri, idet iltordenen formodes at være baggrunden for dannelsen af den orthorhombiske fase.

For at studere disse eksperimentelle resultater nøjere er iltordenen og de strukturelle data blevet analyseret med en tre-dimensionel model, som er defineret ud fra den sædvanligvis anvendte to-dimensionelle ASYNNNI model ved at tilføje en tiltrækkende vekselvirkning mellem nærmeste-nabo iltatomerne i de tilstødende basale  $\text{CuO}_2$ -planer. På grundlag af denne model er den tre-dimensionale strukturfaktor (intensitet og bredde af diffraktionsdata) blevet beregnet ved hjælp af Monte Carlo simuleringer (se Fig. 4). Strukturfaktorerne er blevet analyseret ved tilpasning til Lorentz linieformer, og de resulterende bredder er sammenlignet med de eksperimentelt målte. Korrelationslængderne, som er givet ved den inverse bredde af diffraktionstoppe, er henholdsvis  $10a$ ,  $20b$  og  $3c$ , hvilket er i god overensstemmelse med de ovenfor nævnte eksperimentelle værdier. Dette resultat viser, at den tre-dimensionelle ASYNNNI model giver en kvantitativ god beskrivelse af den lokale iltorden. Det skal imidlertid nævnes, at de nævnte eksperimentelle data var målt ved stuetemperatur, hvilket er dybt inde i den orthorhombiske ortho-II fase, medens beregningerne er udført ved høje temperaturer i den tetragonale strukturelle fase. Foreløbige beregninger af fasediagrammet antyder, at overgangen fra den tetragonal uordnede fase til den orthorhombisk ordnede ortho-II fase kan være adskilt af et smalt område med ortho-I struktur, som kan tænkes at drive den langtrækkende orthorhombiske struktur og efterlade indefrosne domæner med kontrækkende orden af ortho-II struktur. ASYNNNI modellens beskrivelse af de strukturelle forhold i YBCO er imidlertid endnu ikke tilstrækkeligt klarlagt til, at denne fortolkning kan betragtes som endegyldig.

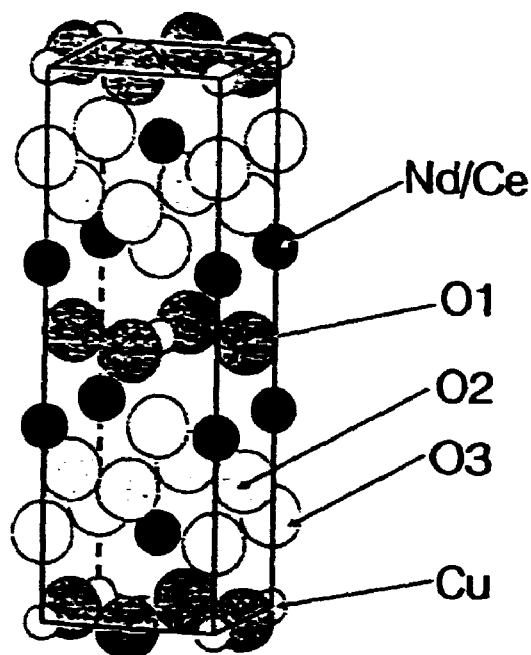


Figur 4: Diffractionsprofiler af  $(\frac{1}{2}, 0, 0)$  superstruktur refleksen langs de tre krystallografiske akser, beregnet ved Monte Carlo simuleringer baseret på en tre-dimensionel version af den såkaldte ASYNNI model. De beregnede korrelationslængder svarer til middel-dimenssøretter med udstrækningen 10a, 20b og 3c.

## 4 Krystalstruktur, magnetisk susceptibilitet og termokraft af superledende og ikke-superledende $\text{Nd}_{1.85}\text{Ce}_{0.15}\text{CuO}_{4+x}$

De superledende egenskaber af  $\text{Nd}_{1-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_{4-y}$  (NCCO) har tiltrukket betydelig interesse. NCCO har den højeste kritiske temperatur,  $T_c = 25$  K, for  $x = 0.15$ , og superledning observeres kun i materialer, der er fremstillet i reducerende atmosfære. På grundlag af disse observationer og formodningen om, at cerium med stor sandsynlighed optræder som  $\text{Ce}^{3+}$ , antages det, at NCCO er en elektronisk leder, og ikke, som de øvrige højtemperatur superledere, en hul-leder.

For at studere disse forhold nærmere er der gennemført eksperimentelle undersøgelser af superledende (reduceret) og ikke-superledende (oxideret)  $\text{Nd}_{1.85}\text{Ce}_{0.15}\text{CuO}_{4-y}$ . De eksperimentelle undersøgelser har omfattet strukturbestemmelse med pulver neutrondiffraction, måling af relativt iltindhold med gasvolumetri, og bestemmelse af superledende og elektriske egenskaber ved måling af magnetisk susceptibilitet og termoelektrisk kraft. Differensdata fra neutrondiffractions målinger foretaget på prøver, der ved hjælp af et gasvolumetrisk udstyr (se EFP90-rapporten: Andersen, N.H. (1992)) er præpareret on-line på neutron diffraktometeret, viser at strukturen af superledende og ikke-superledende NCCO er identisk inden for den statistiske nøjagtighed af de målte data. De samtidige gasvolumetriske målinger viser, at forskellen i iltstøkiometri, når prøven iltes fra den superledende til den ikke-superledende fase er:  $\Delta y < 0.03(1)$ . Strukturaffinering af de målte neutrondiffractions data viser at  $\text{Nd}_{1.85}\text{Ce}_{0.15}\text{CuO}_{4-y}$  har den såkaldte type-T' tetragonale struktur, som er rapporteret i literaturen, men at ekstra ilt svarende til:  $4+y = 4.03(5)$ , kan forefindes på den apikale O3 iltplads i gitteret (se Fig. 5). Den målte termokraft er meget lille, hvilket er i overensstemmelse



*Figur 5: Type-T krystalstrukturen af  $\text{Nd}_{1-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_y$ , bestemt ved analyse af pulver neutrondiffractions data. Iltpositionerne O1 og O2 er i det væsentlige fuldt besat i type-T strukturen. I type-T strukturen af arketype højtemperatur superlederen:  $\text{La}_{1-x}\text{Ba}_x\text{CuO}_y$ , er iltpositionerne O1 og O3 besatte. Analyser af de strukturelle data og de steriske forhold viser imidlertid at mindre mængder af ilt kan placeres på O3 positionen i  $\text{Nd}_{1-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_y$ . De viste atomer er på halv størrelse i forhold til den viste enhedscelle og ekstra ilt på O3 positionerne kræver at de nærliggende atomer redukerer fra deres middelpositioner.*

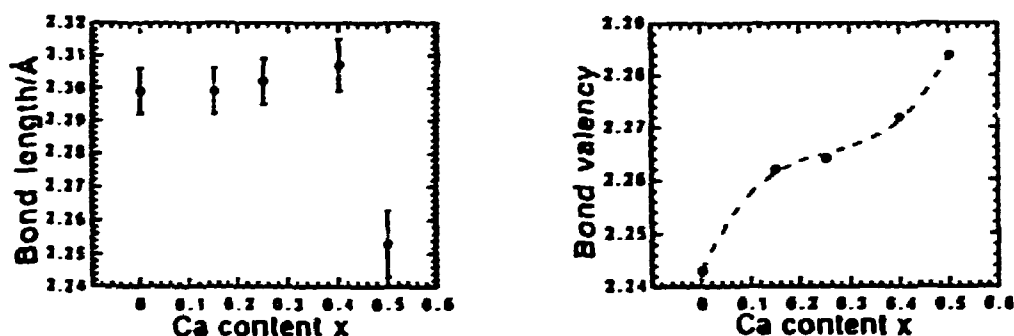
med de strukturelle data, som antyder, at  $\text{Nd}_{1-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_y$  er tæt på den formelle grænseværdi:  $y_c = 0.075$ , for overgangen mellem elektron og hul ledningsevne. I modsætning til forventningerne vedrørende effekten af iltning og reduktions processerne viser det sig imidlertid, at termokraften er positiv (hul-ledning) i den superledende prøve, medens den er negativ (elektron-ledning) i det ikke-superledende materiale for temperaturer under 210 Kelvin. Dette forhold antyder, at de elektroniske forhold i  $\text{Nd}_{1-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_y$  ikke kan fastlægges ud fra simple kemiske valens forhold. Det beskrevne arbejde er publiceret i artiklen: Mangelschots, I. et al. (1992).

## 5 Krystalstruktur og ladningslokalisering i $\text{Pb}_2\text{Sr}_2\text{Y}_{1-x}\text{Ca}_x\text{Cu}_3\text{O}_8$

Materialer med sammensætningen  $\text{Pb}_2\text{Sr}_2\text{Ln}_{1-x}\text{Ca}_x\text{Cu}_3\text{O}_8$ , hvor Ln er et af lanthanide gruppe metallerne, er superledende med kritiske temperaturer i nærheden af 70 K, men kun hvis de er fremstillet i en mildt reducerende atmosfære. Den maksimale  $T_c$  værdi fremkommer i materialer med calcium doping niveauer på  $x = 0.5$ . Materialerne er pseudo-tetragonale, men i realiteten orthorhombiske, og de har

stakke-sekvensen:  $-\text{Ln}-\text{CuO}_2-\text{SrO}-\text{PbO}-\text{Cu}-\text{PbO}-\text{SrO}-\text{CuO}_2-$ , som har mange lighedspunkter med  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-x}$ , ( $\text{PbO}-\text{Cu}-\text{PbO}$  sekvensen erstatter  $\text{CuO}_2$ -planen). Som i de øvrige højtemperatur superledere indeholder  $\text{CuO}_2$ -lagene den for superledningen basale elektronstruktur, men superledningen fremkommer kun, hvis der er passende acceptor enheder i strukturen, som introducerer de nødvendige huller i  $\text{CuO}_2$ -planerne. Formålet med de gennemførte pulver neutrondiffractions undersøgelser har været at studere de strukturelle ændringer, som Ca-dopingen forårsager i  $\text{Pb}_2\text{Sr}_2\text{Y}_1\text{Ca}_x\text{Cu}_3\text{O}_x$ . Af speciel interesse har været studiet af den aksiale Cu-O bindingslængde, der sædvanligvis betragtes som værende af afgørende betydning for den effektive ladningsoverførsel til  $\text{CuO}_2$ -planerne.

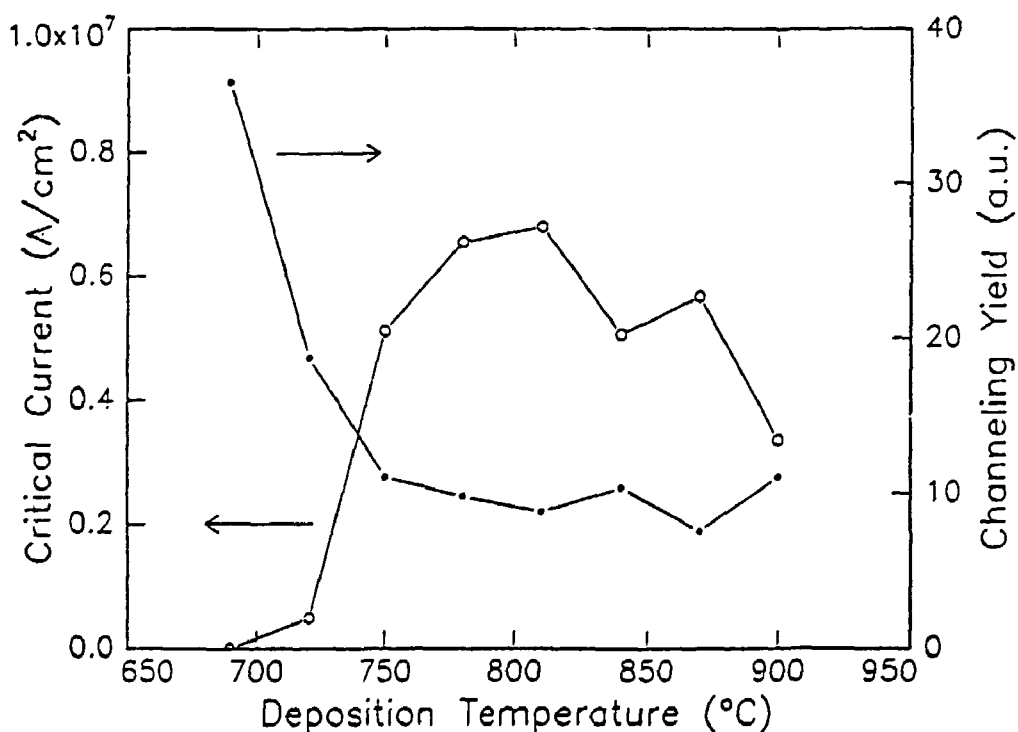
Pulvermaterialer af  $\text{Pb}_2\text{Sr}_2\text{Y}_{1-x}\text{Ca}_x\text{Cu}_3\text{O}_x$  med ( $0 \leq x \leq 0.5$ ) er fremstillet og deres superledende egenskaber er karakteriseret ved måling af den elektriske ledningsevne. Superledning blev kun observeret i prøven med  $x = 0.5$ . Pulver neutrondiffractions dataene er blevet analyseret med standard Rietveld teknik, og bindings-valensen ("bond valency") af alle kationerne er blevet beregnet ud fra de målte interatomare afstande. Den aksiale Cu-O bindingslængde og bindings-valensen af kobber i  $\text{CuO}_2$ -planerne er vist i Fig. 6. Ca-dopingen har kun ringe indflydelse på den aksiale Cu-O bindingslængde for doping niveauer op til  $x = 0.4$ , medens den totale kobber bindings-valens vokser. Bindings-valensen af Pb-ionerne vokser for doping niveauer op til  $x = 0.4$ , og er herefter konstant. På dette grundlag kan det konkluderes, at Ca-dopingen forårsager itning af såvel  $\text{CuO}_2$ -planerne som Pb. Resultaterne viser, hvorfor Ca-dopingen, som skulle introducere de nødvendige huller i de superledende  $\text{CuO}_2$ -planer, først bliver effektiv for doping niveauer:  $x > 0.4$ . Dette arbejde er publiceret i: Jørgensen, J.-E. and Andersen, N.H. (1993).



Figur 6: Til venstre: den aksiale Cu-O bindingslængde som funktion af Ca-doping niveauet. Til højre: Bindings-valensen ("bond valency") af kobber ionerne i  $\text{CuO}_2$ -lagene.

## 6 Deponeringstemperaturens indvirkning på mikrostruktur og kritisk strømtæthed af epitaksielle $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6+x}$ tyndfilm på $\text{SrTiO}_3$ (001)

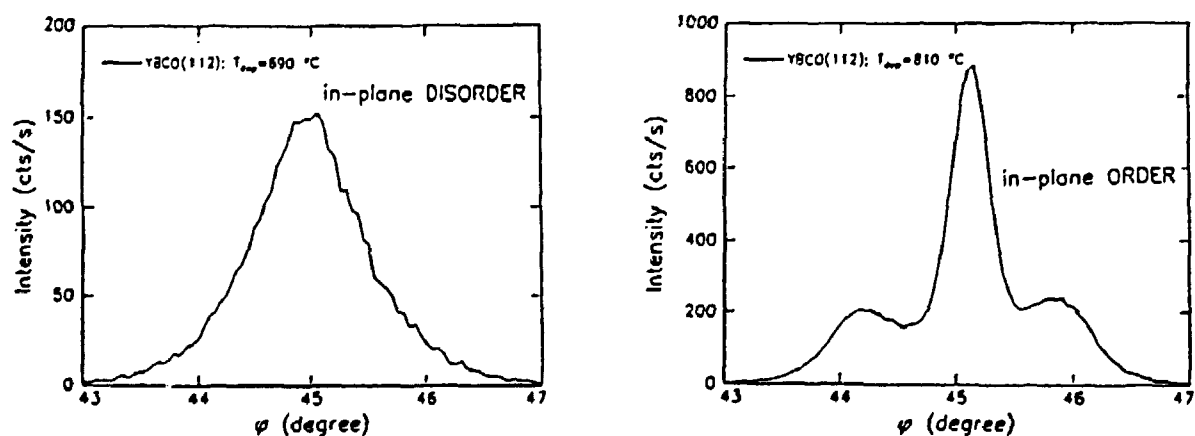
Med laser ablations teknikken overføres target materialets støkiometri let til tyndfilmen, og det er muligt at fremstille  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6+x}$  (YBCO) tyndfilm med høj kvalitet. Det vil sige med overgangstemperaturer,  $T_c$ , på over 90 Kelvin, en bredde på mindre end 1.5 Kelvin, og kritiske strømtætheder,  $J_c$ , på ca.  $1 \times 10^7 \text{ A/cm}^2$ . I et tidligere gennemført studie af YBCO tyndfilm deponeret på  $\text{MgO}$  (001) og  $\text{SrTiO}_3$  (001) substrater (se EFP90 rapporten: Andersen, N.H. (1992)) blev det vist, at variationerne fra "dårlige film" med kritisk strømtæthed,  $J_c$ , på  $3.7 \times 10^5 \text{ A/cm}^2$  til  $1.0 \times 10^7 \text{ A/cm}^2$  i "gode film", skyldes tilstedeværelsen af misorienteret film. Laser ablerede film er overvejende c-akse orienteret (d.v.s., at den krystallografiske c-akse er vinkelret på substratoverfladen), men i "dårlige film" fandtes enten små mængder film, som var a-akse orienteret ( $\text{SrTiO}_3$  substrater), eller var drejet  $45^\circ$  i



Figur 7: Rutherford Backscattering (RBS) channelling udbytte ("channelling yield") og kritisk strømtæthed ved 77 Kelvin i  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6+x}$  tyndfilm fremstillet på  $\text{SrTiO}_3$  (001) substrater ved forskellige deponeringstemperaturer. Den optimale deponeringstemperatur ligger mellem 780 og 810 °C. I dette temperaturinterval opnås den maksimale kritiske strømtæthed, og ifølge RBS og røntgendiffractions målingerne (jvnfr. Fig. 8), den bedste filmkvalitet.

forhold til substratets krystalakser (MgO substrater). Filmene på  $\text{SrTiO}_3$  var generelt de bedste, hvilket tilskrives, at gitterkonstanterne i  $\text{SrTiO}_3$  er bedre tilpasset YBCO end tilfældet er for MgO. Dette medfører bl.a. at YBCO filmene på  $\text{SrTiO}_3$  har større domæner og mindre mosaikfordeling end filmene på MgO.

Undersøgelserne af YBCO film på  $\text{SrTiO}_3$  (001) er blevet udvidet med henblik på at fastlægge baggrunden for de observerede forskelle i filmkvaliteten (specielt den kritiske strømtæthed), der fremkommer, når deponeringstemperaturen varieres fra 690 til 900 °C. Strukturelle undersøgelser er gennemført med traditionel pulver røntgendiffraktion med anvendelse af en Euler fire-cirkel geometri (se EFP90 rapporten: Andersen, N.H. (1992)), og med Rutherford Backscattering Spektroskopi (RBS). I lighed med de ovenfor refererede undersøgelser var de underøgte film c-akse orienterede og de havde sammenlignelige kritiske temperaturer ( $T_c = 90$  Kelvin). Røntgendiffraktionsundersøgelserne viste ingen tegn på a-akse orienteret materiale eller domæner, som var roteret 45° i filmplanen. Imidlertid var den kritiske strømtæthed af de fremstillede film stærkt varierende med et maksimum for film deponeret i temperaturintervallet fra 780 til 810 °C, som vist på Fig. 7. Channelling eksperimenterne med RBS har vist, at disse film har lavt tilbagesprednings udbytte og dermed høj filmkvalitet, som vist i Fig. 7. For film deponeret ved lavere temperaturer, blev der observeret betydeligt højere tilbagesprednings udbytter, hvilket tilskrives tilstedeværelsen af lokale defekter i filmene. Også i røntgendiffraktions undersøgelserne blev den forringede filmkvalitet observeret for deponeringstemperaturer under 780 °C. I disse film voksede mosaiciteten i filmplanen og domænestørrelsen aftog. Dette er eksemplificeret i Fig. 8, hvor "rokke"-kurven gennem (112) Bragg refleksen er vist for to film. På grund af tvillingedannelse (de to krystallografiske a- og b-akser er næsten lige lange) er denne Bragg refleks opsplittet i tre adskilte toppe, som det fremgår af højkvalitetsfilmen fremstillet ved 810 °C. For filmen, der er fremstillet ved 690 °C, flyder disse tre toppe sammen. I filmene, der er fremstillet ved temperaturer over 810 °C, blev der observeret betydelige mængder af urenhedsfaser. Dette arbejde ventes publiceret i den nærmeste fremtid.

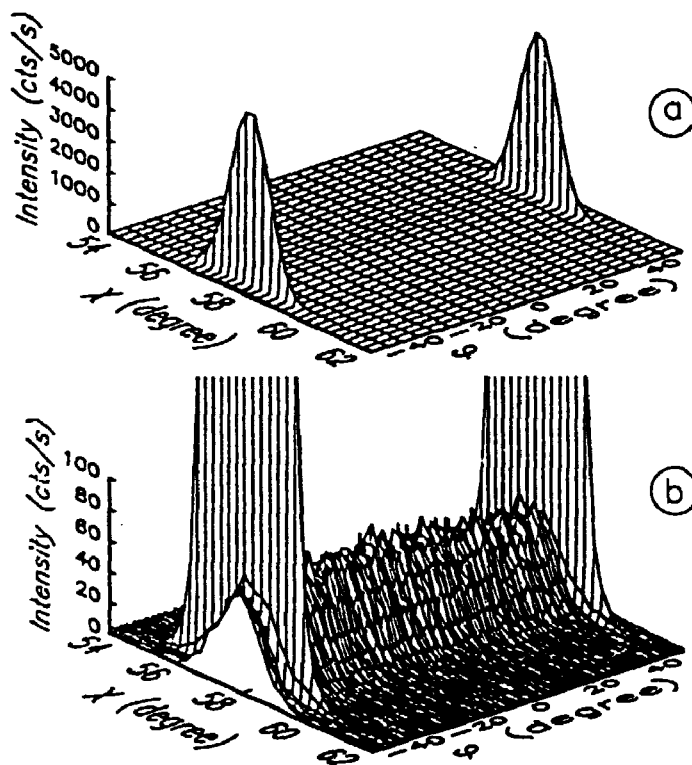


Figur 8: Rokke-kurver fra røntgendiffraktions målinger gennem (112) Bragg refleksen af  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6+x}$  tyndfilm deponeret på  $\text{SrTiO}_3$  (001) ved 690 °C (til venstre) og 810 °C (til højre).

## 7 Strukturelle undersøgelser af epitaksielle $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_{8+x}$ tyndfilm på $\text{MgO}$ (001), $\text{LaAlO}_3$ (001), og $\text{NdGaO}_3$ (001)

Til mange teknologiske anvendelser er  $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_{8+x}$  et lovende højtemperatur superleder materiale på grund af dets termodynamiske stabilitet og høje kritiske strømtætheder ved lave temperaturer. Laser ablerede tyndfilm af  $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_{8+x}$  er fremstillet på forskellige substrater. Deponeringsprocessen er blevet optimeret, og deponeringsparametrene indflydelse på de elektriske og strukturelle egenskaber af filmene er blevet undersøgt. Den højeste filmkvalitet forventes for deponeringstemperaturer, som er højere end rekrytallisations temperaturen for Bi-Sr-Ca-Cu-O, således at krystallinske film dannes direkte under deponeringen. Ved deponeringstemperaturer over 500 °C, viser der sig et betydeligt Bi-tab, som resulterer i dannelse af ikke-ønskede fremmede faser. Af denne grund er amorfe Bi-Sr-Ca-Cu-O blevet deponeret ved 500 °C og derefter annealet i luft. Den optimale post-annealing temperatur er 850 °C. På substraterne  $\text{MgO}$  (001),  $\text{NdGaO}_3$  (001) og  $\text{LaAlO}_3$  blev c-akse orienterede film med kritiske temperaturer på over 80 Kelvin fremstillet. Da den krystallinske vækst af  $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_{8+x}$  imidlertid foregår under den efterfølgende annealing bliver mulighederne for dannelse af en fuldt epitaksial fase (c-akse orienteret og strukturel orden i filmplanen) reduceret. Krystalliseringsprocessen for dannelsen af  $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_{8+x}$  fasen forventes at udbrede sig fra grænselaget mellem substrat og tyndfilm, og det forventes, at den epitaksielle vækst favoriseres af en god gittertilpasning mellem substrat og film. For  $\text{LaAlO}_3$  og  $\text{NdGaO}_3$  er denne afvigelse mellem gitterkonstanterne mindre end 1%, og mere end 50% af filmen er fuldt epitaksial, medens den resterende del er tilfældigt fordelt i filmplanen (ab-planen) (se Fig. 9). På  $\text{MgO}$  substrater, hvor gitterkonstanterne afviger med 10%, observeres en vis grad af oplining af  $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_{8+x}$  filmen langs substratakserne, men en stor del af filmen er tilfældigt orienteret i ab-planen. Dette arbejde er publiceret i artiklerne: Seeman, R. et al. (1992) og de Reus, R. et al. (1992).





Figur 9: (a) Euler fire-cirkel røntgendiffraktions undersøgelser af  $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_{x+x}$  (115) Bragg refleksen fra en tyndfilm fremstillet på  $\text{NdGaO}_3$  (001) som funktion af Euler vinklerne  $\chi$  og  $\varphi$  (for flere detaljer om Euler fire-cirkel geometrien, se EFP90-rapporten: Andersen, N.H.(1992)). For fuldt epitaksielle film forventes to skarpe toppe ved  $\chi = 57.5^\circ$ , og  $\varphi = -45^\circ$  og  $\varphi = 45^\circ$ , som observeret. (b) En nøjere analyse viser imidlertid, at der mellem disse dominerende toppe også er en homogen fordeling af (115) spredningsintensitet for alle  $\varphi$ -værdier, svarende til at en del af filmen er tilfældigt orienteret i filmplanen.

## 8 Samarbejde og kommunikation af resultater

Det gennemførte arbejde er foretaget i nært samarbejde med en række danske og udenlandske forskere. Blandt de danske forskere skal nævnes:

J. Vitting Andersen, Post doc. ved McGill University, Montreal  
 T. Freltoft, NKT Reserach Center A/S  
 C. Schelde Jacobsen, Fysisk Laboratorium 3, DTH  
 J.-E. Jørgensen, Kemisk Institut, Aarhus Universitet  
 K. Linkenkær-Hansen, Fysisk Institut, Aarhus Universitet  
 O.G. Mouritsen, Fysisk-Kemisk Institut, DTH  
 H. Friis Poulsen, Post doc., Hasylab, Hamburg  
 P. Vase, NKT Research Center A/S

Det direkte udenlandske samarbejde omfatter følgende forskere:

L. Börjesson, Chalmers University of Technology, Göteborg  
R. Hadfield, Clarendon Laboratory, Oxford  
R.L. Johnson, Universität Hamburg  
M. Kakihana, University of Tokyo  
J. Mangelschots, IBM Research Laboratory, Zürich  
R.L. McGreevy, University of Nyköping  
R. Seemann, Universität Hamburg  
A. Wisniewski, Polish Academy of Sciences, Warszawa

Udover det rapporterede arbejde har R. de Reus fortsat sit samarbejde med University of Twente omkring studier af interdiffusion og termisk stabilitets egenskaber af bufferlag; bl.a. til anvendelse i forbindelse med højtemperatur superledere (se: Aarnink, W.A.M. et al. (1991)).

I forbindelse med det udførte arbejde har civ.ing. Rasmus Kromann gennemført et Ph.d. studium (se: Kromann, R. (1992)) og i denne sammenhæng været på studieophold hos Prof. John Clarke på University of Berkeley, som er en af de førende internationale eksperter inden for udvikling af superleder elektronik. Under dette studieophold har han med succes udnyttet den viden, der er etableret inden for nærværende projekt til at fremstille egnede film til udvikling af superleder SQUID's, og han har deltaget i egentligt SQUID udviklingsarbejde. Resultaterne fra dette udviklingsarbejde er publiceret i artiklerne: Kromann, R. (1993) og Miklich, A.H. (1993). Efter afslutningen af sit Ph.d. arbejde har Rasmus Kromann været tilknyttet NKT Research Center A/S, hvor hans viden om strukturel karakterisering af tyndfilm og SQUID udvikling udnyttes i firmaets eget arbejde på området.

Det gennemførte arbejde er blevet præsenteret ved en række konferencer, møder og foredrag. Bidragene for 1991 er medtaget i EFP90 rapporten: Andersen, N.H. (1992). Bidragene for 1992 omfatter bl.a.:

**Konferencebidrag:**

Andersen, N.H., *Structural properties and superconductivity of high  $T_c$  superconductors*. Kemisk Forenings Årsmøde, Odense (juni).

Andersen, N.H., *Risø facilities and structural studies on high temperature superconductors*. Workshop of the EC Working group on: "The influence of the local structure on the macroscopic superconducting properties of samples in the Y-Ba-Cu-O and related systems. El Escorial, Madrid (oktober).

Andersen, N.H., Andersen, J.V., Börjesson, L., Hadfield, R., Kakihana, M., McGreevy, R., Mouritsen, O.G., and Poulsen, H.F., *The role of disorder and defect structures in high temperature superconductivity*. Two Days Contractors Workshop on EC Activities in High Temperature Superconductivity. Strasbourg (november).

Andersen, N.H., Andersen, J.V., Börjesson, L., Hadfield, R., Kakihana, M., McGreevy, R., Mouritsen, O.G., and Poulsen, H.F., *Structure and superconductivity in Co, Fe, and Al doped  $YBa_2Cu_3O_{6-x}$* . European Materials Research Society 1992 Fall Meeting. Strasbourg (november).

Fiig, T., Poulsen, H.F., Andersen, N.H., Lindgård, P.-A., and Mouritsen, O.G., *Solving the 3-D ASYNINI model on the Connection Machine*. Joint Nordic Spring Meeting '92. Nyborg Strand (maj).

Fiig, T., *Solving the 3-D ASYNINI model on the Connection Machine*. STATFYS 18 (Statistical Physics), Berlin (august).

Jørgensen, J.-E. and Andersen, N.H., *Crystal structure and charge localization in  $\text{Pr}_2\text{Sr}_2\text{Y}_{1-x}\text{CaCu}_2\text{O}_8$  for  $x = 0.0-0.5$* . Joint Nordic Spring Meeting '92. Nyborg Strand (maj).

Kingston, J.J., Kromann, R., Miklich, A.H., Sagdahl, L., Saito, Y., Dantsker, E., and Clarke, J., *High- $T_c$  multilayers for Josephson junctions and interconnects*. 1992 March Meeting of the American Physical Society, Indianapolis (marts).

Kromann, R., Kingston, J.J., Miklich, A.H., Sagdahl, L.T., Saito, Y., and Clarke, J., *High- $T_c$  SQUID's and magnetometers*. Joint Nordic Spring Meeting '92. Nyborg Strand (maj).

Kromann, R., de Reus, R., Andersen, N.H., Bilde-Sørensen, J.B., Vase, P., and Freltoft, T., *Relation between critical current and in-plane ordering of  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{8-x}$  on  $\text{MgO}$  (001) and  $\text{SrTiO}_3$  (001)*. Joint Nordic Spring Meeting '92. Nyborg Strand (maj).

Miklich, A.H., Kingston, J.J., Wellstood, F.C., Kromann, R., Sagdahl, L.T., Dantsker, E., Clarke, J., Char, K., Colclough, M.S., and Zaharchuk, G., *High- $T_c$  thin film magnetometers for low frequency applications*. SC Global 92, San Diego (januar).

Poulsen, H.F., Andersen, N.H., Lebech, B., Andersen, J.V., Bohr, H., Mouritsen, O.G., Zeiske, T., Sonntag, R., Hohlwein, D., and Wolf, T., *Oxygen order and superconductivity in pure and doped  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{8-x}$* . Joint Nordic Spring Meeting '92. Nyborg Strand (maj).

de Reus, R., Kromann, R., Nielsen, M., Andersen, N.H., Kringhøj, P., Vase, P., Hansen, K.L., Freltoft, T., Seemann, R., and Johnson, R.L., *Structural characterization of thin-film high- $T_c$  superconductors*. Seminar om Avanceret Elektronik, H.C. Ørsted Institutet, København (april).

de Reus, R., Seemann, R., Nielsen, M., Sewing, A., and Johnson, R.L., *Epitaxial growth of high- $T_c$  superconducting  $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_{8-x}$  thin-films on  $\text{MgO}$  (001),  $\text{LaAlO}_3$  (001), and  $\text{NdGaO}_3$  (001)*. Joint Nordic Spring Meeting '92. Nyborg Strand (maj).

Foredrag:

Andersen, N.H., *Højtemperatur superledning*. Dansk Institut for Økologisk Teknik, Valby (marts).

Andersen, N.H., *Structural properties of high- $T_c$  superconductors*, University of Kiel (januar).

Andersen, N.H., *Structural ordering and superconductivity in pure and M-doped  $YBa_2Cu_3O_{4-x}$* . Hahn-Meitner-Institute, Berlin (september)

Andersen, N.H., *Structural ordering and superconductivity in pure and M-doped  $YBa_2Cu_3O_{4-x}$*

Department of Physics, Chalmers University of Technology (oktober).

Andersen, N.H., *Structural ordering and superconductivity in pure and M-doped  $YBa_2Cu_3O_{4-x}$*

Department of Physics, University of British Columbia, Vancouver (november).

Andersen, N.H., *Structural aspects of high-temperature superconductors*. Lecture series on modern aspects of solid state physics. Risø National Laboratory (september).

Der er endvidere givet en række populære foredrag og undervisning om højtemperatur superlederes egenskaber. P.-A. Lindgård og N.H. Andersen har været chairmen for henholdsvis: Joint Nordic Spring Meeting '92 (P.-A.L.) og delsymposiet: 3rd Nordic Symposium on Superconductivity (N.H.A.), 7-10 maj, 1992 på Hotel Nyborg Strand. N.H. Andersen har siden september, 1992 været konsulent for det svenske højtemperatur superlederprogram.

Støtte: Udover bidraget fra EFP-programmerne er der modtaget støtte fra: MUP-programmet, Forskerakademiet, og CEC Science og Esprit programmerne.

# Referencer

Andersen, N.H. (1992), Strukturelle undersøgelser af keramiske superledere. EFP-90 slutrapport (EM-Journal nr. 1443/90-0006). Denne rapport vil udkomme som Risø rapport: Risø-R-649(DA). Risø National Laboratory, Roskilde, Denmark (1993).

Aarnink, W.A.M., Blank, D.H.A., Adelerhof, D.J., Flokstra, J., Rogella, H., van Silfhout, A., and de Reus, R. (1991), Interdiffusion studies on high- $T_c$  superconducting  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$  thin films on Si (111) with a  $\text{NiS}_2/\text{ZrO}_2$  buffer layer. *Applied Surface Science* **47**, 195-203.

Kromann, R. (1992), Deposition, characterization, and electronic applications of  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$  thin films. Licentataafhandling. Risø-R-642(EN). Risø National Laboratory, Roskilde, Denmark.

Seemann, R., Hänisch, F., Sewing, A., Johnson, R.L., de Reus, R., and Nielsen, M., Growth and properties of laser-ablated  $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_{8-\delta}$  thin films (1992). *Physica C* **199**, 112-120.

Mangelschots, I., Andersen, N.H., Lebech, B., Wisniewski, A., and Jacobsen, C.S. (1992), Crystal structure, magnetic susceptibility and thermopower of superconducting and non-superconducting  $\text{Nd}_{1-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_{4-y}$ . *Physica C* **203**, 369-377.

de Reus, R., Nielsen, M., Seemann, R., Sewing, A., and Johnson, R.L. (1993). Epitaxial growth of thin-film  $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_{8-x}$  on  $\text{MgO}$  (001),  $\text{LaAlO}_3$  (001), and  $\text{NdGaO}_3$  (001). I: *Electronic Properties of High- $T_c$  Superconductors*, Edited by H. Kuzmany, M. Mehring, and J. Fink, Springer Verlag, Heidelberg, 1993, 62-65.

Andersen, N.H., Andersen, J.V., Börjesson, L., Hadfield, R., Kakihana, M., McGreevy, R., Mouritsen, O.G., and Poulsen, H.F. (1993), Structure and superconductivity in Co doped  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{x-y}$ . *Journal of Alloys and Compounds* **195**, 327-330.

Miklich, A.H., Koelle, D., Dantsker, E., Nemeth, D.T., Kingston, J.J., Kromann, R.F., and Clarke, J. (1993). Bicrystal YBCO DC Squids with low noise. *IEEE Transactions on Applied Superconductivity* **3** no. 1, 2434-2437.

Kromann, R., Kingston, J.J., Miklich, A.H., Sagdahl, L.T., and Clarke, J. (1993), Integrated high-transition temperature magnetometer with only two superconducting layers. *Appl. Phys. Lett.* **63** no. 4, 559-561.

Jørgensen, J.-E. and Andersen, N.H. (1993), Crystal structure and charge localization in  $\text{Pb}_2\text{Sr}_2\text{Y}_{1-x}\text{Ca}_x\text{Cu}_3\text{O}_x$  for  $x = 0.0 - 0.5$ . *Physica C* **218**, 43-50.

## Title and author(s)

## Defect Structures in Ceramic Superconductors

Niels Hessel Andersen

ISBN		ISSN	
87-550-1931-5		0106-2840	
Dept. or group		Date	
Department of Solid State Physics		December 1993	
Groups own reg. number(s)		Project/contract no.(s)	
EFP-91		ENS-1443/91-0005	
Pages	Tables	Illustrations	References
20		9	10

## Abstract (Max. 2000 characters)

The influence of the defect structure on the superconducting properties of high temperature superconductors has been studied experimentally and by computer simulation technique. The relation between defect structure and the superconducting transition temperature,  $T_c$ , has been studied in Co-doped YBCO ( $\text{YBa}_2\text{Cu}_{3-y}\text{Co}_y\text{O}_{6+x}$ ,  $0 \leq y \leq 0.5$ ), and it has been shown that the model, which has been established to account for the influence of oxygen ordering on  $T_c$  in oxygen deficient YBCO ( $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6-x}$ ,  $x < 1$ ), is valid also for Co-doped YBCO. A three-dimensional model for the oxygen ordering in undoped YBCO has been introduced and used to analyse experimental structural data. Good agreement between the model predictions and the experimental data has been established. Experimental studies of crystal structure, oxygen stoichiometry, and electrical and magnetic properties of  $\text{Nd}_{1-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_{4+x}$  have been carried out in order to elucidate why this material apparently is an electron conductor in the superconducting phase, and not as the other high temperature superconductors, a hole conductor. Structural studies on  $\text{Pb}_2\text{Sr}_2\text{Y}_{1-x}\text{Ca}_x\text{Cu}_3\text{O}_8$  ( $0 \leq x \leq 0.5$ ) have been carried out by neutron powder diffraction and it has been shown how the Ca-stoichiometry influence the Cu-valence in the superconducting  $\text{CuO}_2$ -planes. The structural ordering of epitaxial thin films of YBCO and  $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_{8+x}$  deposit on heated substrates of  $\text{SrTiO}_3$ ,  $\text{MgO}$ ,  $\text{LaAlO}_3$  and  $\text{NdGaO}_3$  has been studied by x-ray diffraction and Rutherford Backscattering spectroscopy, and the structural ordering has been analysed in relation to the superconducting properties.

## Descriptors INIS/EDB

BARIUM OXIDES; COMPUTERIZED SIMULATION; COPPER OXIDES; CRYSTAL DEFECTS; CRYSTAL DOPING; EXPERIMENTAL DATA; HIGH-TC SUPERCONDUCTORS; NEODYMIUM OXIDES; ORDER-DISORDER TRANSFORMATIONS; OXYGEN; RUTHERFORD SCATTERING; STOICHIOMETRY; THIN FILMS; TRANSITION TEMPERATURE; YTTRIUM OXIDES; X-RAY DIFFRACTION

## FORMÅL

Risø har til formål at fremme den teknologiske udvikling inden for hovedområderne:

**Energi**

**Miljø**

**Materialer**

## BRUGERE

Risø's forskning sigter mod at skabe viden, der kan anvendes af:

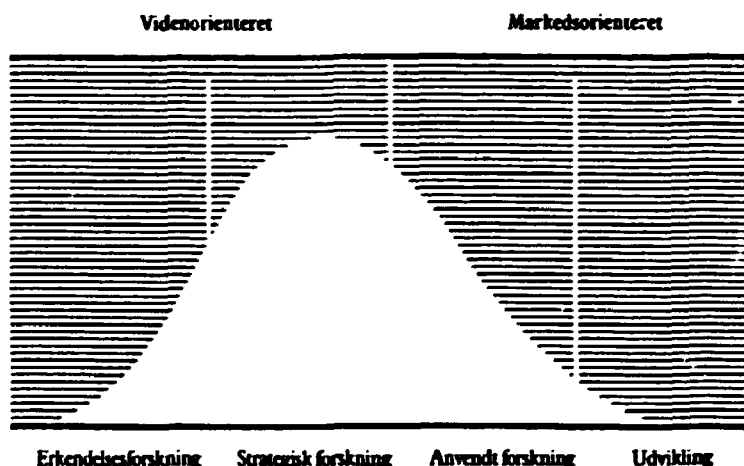
**Forskningsverdenen**

**Erhvervslivet**

**Myndighederne**

## FORSKNINGSPROFIL

Risø's forskning er hovedsagelig strategisk, d.v.s. at den er langsigtet og skaber viden på områder, hvor der er et samfundsmæssigt behov.



## INDSATSOMRÅDER

- Forbrænding og forgasning
- Vindenergi
- Energimaterialer
- Energi- og miljøplanlægning
- Vurdering af miljøbelastninger
- Begrænsning af miljøbelastninger
- Tekniske systemers sikkerhed og pålidelighed
- Nuklear sikkerhed
- Materialers atomare struktur og egenskaber
- Avancerede materialer og materialeteknologi
- Optik og fluid dynamik

Risø-R-710(DA)  
ISBN 87-550-1931-5  
ISSN 0106-2840

Rekvireres fra  
Risø Bibliotek  
Forskningscenter Risø  
Postboks 49, 4000 Roskilde  
Telefon 46 77 46 77, lokal 4004/4005  
Telex 43116, Telefax 46 75 56 27